

# 久保公式とグリーン関数法の実践的基礎 (その 1)

伏屋雄紀<sup>1</sup>, 福山秀敏<sup>2</sup>

<sup>1</sup> 電気通信大学大学院情報理工学研究科, <sup>2</sup> 東京理科大学

## 1 はじめに

凝縮系物理学における実験の基本概念は, 対象に何らかの外場を加え, その応答を観測することである. 電場に対して電流, 磁場に対して磁化率, 温度差に対して熱流, 等々. 物質の性質とは, まさにこれら外場に対する応答の特徴を指す.

この外場によって系は熱平衡状態から外れて非平衡状態となる. 理論において非平衡状態を取り扱うのは非常に難しい問題となるが, 外場とその応答が比例関係にある線形応答の範囲内では, 外場による熱平衡からのずれは熱平衡状態におけるゆらぎと等価になる. この事実を用いて微視的なハミルトニアンから厳密に物理量を計算する統計力学の一般公式がいわゆる久保公式である<sup>1)</sup>. 久保公式において, その中心的役割を担うのは応答関数であり, 実験に直接対応する理論を構築することはすなわち, その応答関数を計算することに集約される. そして応答関数を計算する簡明ながら非常に強力な理論が, グリーン関数を用いた方法である.

グリーン関数およびファインマン図形の方法については「AGD」の略称で知られるアプリコソフ・ゴリコフ・ジャロシンスキーの「統計物理学における場の量子論の方法」をはじめ, これまでに様々な教科書が出版されている<sup>2)-7)</sup>. 凝縮系理論に携わる研究者は, これらの教科書を必ず一度は手に取り, 基本的素養として修練したことであろう. ただし, グリーン関数に基づく計算が「簡明」であるとしたが, それはあくまでその技法を一通り習得した状況ではその適用が簡明なのであって, 入門者にとっては必ずしも簡明とは言い切れない側面もある. 少なくとも最近の風潮では, 古くから読み継がれている定番教科書の重厚さにその習得を諦める傾向が年々強くなってきているように見受けられる. グリーン関数の基本的取扱いを習得するのに時間を費やしてしまい, 実際の応用例に

たどり着く前に息切れして断念してしまっている場合が多いようである.

こうした現状を鑑み, 本連載では基礎的方法論の記述は最小限にとどめ, 久保公式とグリーン関数法を用いた具体例を多く取り上げることにより, 実践的に学ぶことを目的とした. その具体例として本連載では, 電気伝導度, ホール効果, 異常ホール効果, アンダーソン局在といったトピックスを取り上げる予定である.

読者としては, 学部 4 年生から修士課程の大学院生を想定しており, 標準的な量子力学と統計力学を理解していれば読み進めることができる. 本連載を読了後, 直ちに具体的な研究へと応用できることを意識した. また, グリーン関数の基礎的方法論の部分では, 少し珍しい運動方程式に基づく論理展開に従っているため, 一通り学んだ人にとっても別視点から全体を眺めなおすことができるであろう.

全体の見通しを良くするため, できる限りコンパクトになるよう努めた. 煩雑な数学的証明に触れない一方で, 現れる数式は全て手で追えるよう配慮した. 各項目の詳しい解説に入る前にその必然性, 道筋を示すことで, モチベーションを保ちやすいように心がけた. また, 計算を進める上でのコツを付記し, 初学者がつまづきやすい点に対して注意を促すことも行った.

## (その 1) の内容

本稿では, グリーン関数の導入から始め, グリーン関数を求める具体的な計算法を解説し, それが如何なる情報を含んでいるかをみる. グリーン関数にはいくつかの形式があり状況に応じて使い分けるが, ここでは凝縮系物理学において最も重要である温度グリーン関数 (松原形式) を取り上げる. この形式を一通り学んでおけば, 他の形式の習得は容易である. 標準的な教科書での流れ—はじめ

に摂動展開の一般論（S行列，ウィックの定理，ダイソン方程式）を解説する—を採用せず，グリーン関数に対する運動方程式から出発し，逐次的に高次項を取り入れる．ダイソン方程式と運動方程式は本質的に同じであるので，どちらも同じ結果を得るが，後者の方が論理の構造が簡明で，初学者には学び易いと考えからである．

本稿最後に（その1）の内容をまとめたので，先にそこに目を通していただいてから読み進めると，より全体像を把握しやすいであろう．

## 2 グリーン関数の素描

### 2.1 グリーン関数と生成・消滅演算子

本格的な議論に進む前に，まずグリーン関数のおよそのイメージをつかめばその後の議論がより理解しやすくなるであろう．グリーン関数は生成・消滅演算子を用いて定義される．生成演算子  $\psi^\dagger(\mathbf{r}, t)$  とは，その右側の状態に粒子を一つ付け加え，消滅演算子  $\psi(\mathbf{r}, t)$  はその右側の状態から粒子を一つ取り除く<sup>1</sup>．引数  $(\mathbf{r}, t)$  はその演算が行われる位置と時刻を表し，その時間依存性はハミルトニアン  $\hat{H}$  を用いて  $\psi(\mathbf{r}, t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}\psi(\mathbf{r}, 0)e^{-i\hat{H}t/\hbar}$  で与えられている．このように演算子に時間依存を含む表示をハイゼンベルグ表示という．この生成・消滅演算子を用いれば，粒子の密度演算子は

$$\hat{n}(\mathbf{r}, t) = \psi^\dagger(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t) \quad (1)$$

で表すことができる．ボーズ統計およびフェルミ統計の要請により，生成・消滅演算子の交換関係

<sup>1</sup>より正確には， $\psi^\dagger$  と  $\psi$  は場の理論における粒子場の演算子を表し，

$$\begin{aligned} \psi^\dagger(\mathbf{r}) &= \sum_i \varphi_i(\mathbf{r}) a_i^\dagger, \\ \psi(\mathbf{r}) &= \sum_i \varphi_i(\mathbf{r}) a_i \end{aligned}$$

で表される．ここで  $\varphi_i(\mathbf{r})$  は状態  $i$  の波動関数で， $a_i^\dagger$ ， $a_i$  が通常の意味での生成・消滅演算子である．

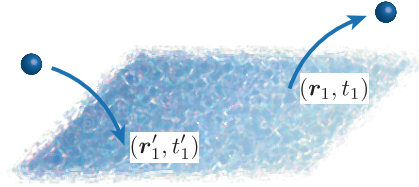


図1: グリーン関数のイメージ．平衡状態に粒子をひとつ加え，その後粒子を一つ取り除いて平衡状態に戻すまでの「擾乱の伝播」を表す．

は次のように与えられる．

$$\psi(\mathbf{r}, t)\psi^\dagger(\mathbf{r}', t) \mp \psi^\dagger(\mathbf{r}', t)\psi(\mathbf{r}, t) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2)$$

$$\psi(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}', t) \mp \psi(\mathbf{r}', t)\psi(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (3)$$

$$\psi^\dagger(\mathbf{r}, t)\psi^\dagger(\mathbf{r}', t) \mp \psi^\dagger(\mathbf{r}', t)\psi^\dagger(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (4)$$

符号は上側がボーズ統計，下側がフェルミ統計に対応している．

グリーン関数は「生成・消滅演算子の積  $\psi(1)\psi^\dagger(1')$  の平衡状態における平均」により定義される．例えば時間順序グリーン関数と呼ばれる形式では

$$G(1, 1') = -i\langle T\{\psi(1)\psi^\dagger(1')\} \rangle. \quad (5)$$

がその定義である． $\langle \dots \rangle$  は熱平衡状態での期待値を表し， $(\mathbf{r}_1, t_1; \mathbf{r}_{1'}, t_{1'})$  を  $(1, 1')$  と表記してある． $T\{\dots\}$  は時間順序積であるが，とりあえず今は無視していただいて構わない．

### 2.2 グリーン関数のイメージ

後にグリーン関数の様々な性質を論じるが，本質は（5）式から読み取れる．すなわち，グリーン関数とは，熱平衡状態に粒子を一つ加えた（あるいは取り除いた）ときの「擾乱の伝播」を表現している（図1）．例えば  $t_1 > t_{1'}$  の場合，「熱平衡状態で  $(\mathbf{r}_{1'}, t_{1'})$  において粒子を一つ加え，その後  $(\mathbf{r}_1, t_1)$  において粒子を一つ取り除く」という過程

についての熱平衡状態での期待値である。たったこれだけのことであるが、そこに驚くほど多くの情報が含まれている。

例えば穏やかな湖面に石を投げ入れたときを想像して欲しい。我々が知りたいのは水中の情報であるが、鏡のような湖面を眺めているだけではそれは計り難い。そこで石を投げ入れ、湖に「擾乱」を加える。その擾乱の様子をうかがえば湖水があるいはドロドロであったかもしれないことが分かる。まさに外場とその応答の関係である。グリーン関数もこれに似て、平衡状態に擾乱を加えることで、その平衡状態の多彩な情報を引き出すことができる。

### 2.3 場の量子論の発展経緯

場の量子論の方法は、グリーン関数に基づいた計算法により大いに発展した。多体問題においては摂動展開の無限次数までを考慮する必要があるが、この問題に対してファインマン図形の方法は驚くほど有効であり、 $T = 0$ における場の量子論の発展に大きく寄与した。当然これらの成功を  $T \neq 0$  に展開することが考えられたが、次節で述べる通り、 $T = 0$ のグリーン関数をそのまま  $T \neq 0$  に拡張しただけでは、ファインマン図形の方法を用いることができないという大きな困難にぶつかった<sup>2</sup>。

この困難を克服したのが松原によって導入された温度グリーン関数である<sup>8)</sup>。この成功はランダウの絶賛を博したという。温度グリーン関数の登場により、 $T \neq 0$ における熱力学的物理量も  $T = 0$ とほとんど同じファインマン図形の方法に基づいて非常に明快に計算することが可能となった。

松原理論の主たる計算対象は熱力学ポテンシャルであり、温度グリーン関数は熱力学的特性を決定するには十分であったが、輸送係数などその他一般の物理量を直接計算することはできなかった。そうした時間に依存する力学的現象についてはさらに久保公式に基づいて応答関数を計算する必要

<sup>2</sup> $T = 0$ では、グリーン関数を“相互作用表示”し、そこで現れるS行列を摂動展開することでファインマン図形の方法が適用可能となる。しかし  $T \neq 0$ の場合、そのままでは相互作用表示での記述ができないことから、ファインマン図形を用いた計算も不可能になる。

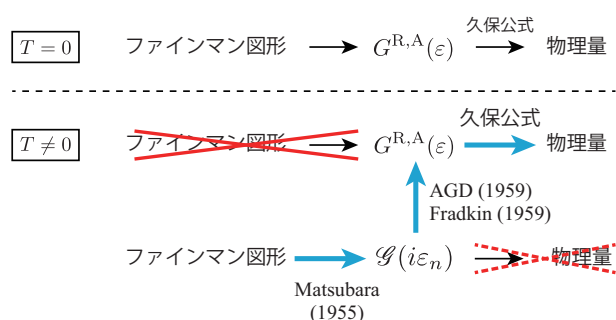


図 2: 場の量子論の発展経緯。  $G^{R,A}$  は遅延・先進グリーン関数、 $\mathcal{G}$  は温度グリーン関数を表す。有限温度の場合は様々な制約があって一筋縄では行かないが、最終的にはファインマン図形 温度グリーン関数 遅延・先進グリーン関数（久保公式を通して）物理量と辿ることで具体的な計算が可能となった（後述する光電子分光で測定されるスペクトル関数  $A(\epsilon)$  については、遅延グリーン関数から直接求められる。）

がある。そこで現れるのは通常的时间順序（因果とも）グリーン関数、あるいはより解析性の優れている遅延・先進グリーン関数である。そこで温度グリーン関数と遅延先進グリーン関数を対応付けたのがアブリコソフ・ゴリコフ・ジャロシンスキー<sup>9)</sup>とフラトキン<sup>10)</sup>である。これにより、ファインマン図形 温度グリーン関数 遅延・先進グリーン関数（久保公式を通して）物理量の全道筋が開通した（図 2）。

## 3 温度グリーン関数の導入

前節で見たように、グリーン関数は基本的に生成と消滅演算子の積の期待値で与えられる。ただし厳密には、目的に合わせてその定義をわずかであるが変更する。このため、ひとことでグリーン関数といっても実際には幾つかの種別がある<sup>3</sup>。グ

<sup>3</sup>よく用いられるものとして、次のようなものがある。

time ordered	$G(1, 1') = -i\langle T\{\psi(1)\psi^\dagger(1')\}\rangle$
retarded	$G^R(1, 1') = -i\theta(t-t')\langle\{\psi(1), \psi^\dagger(1')\}\rangle$
advanced	$G^A(1, 1') = i\theta(t'-t)\langle\{\psi(1), \psi^\dagger(1')\}\rangle$
greater	$G^>(1, 1') = -i\langle\psi(1)\psi^\dagger(1')\rangle$
lesser	$G^<(1, 1') = i\langle\psi(1')^\dagger\psi(1)\rangle$
contour ordered	$G(1, 1') = -i\langle T_C\{\psi(1)\psi^\dagger(1')\}\rangle$

リーマン関数を解説する一般的な教科書では、まず絶対零度のグリーン関数を導入してから有限温度での定式化へと進むのが標準的である<sup>2)-4)</sup>。しかし凝縮系物理において実際に必要なのは有限温度の場合がほとんどであり、たとえ絶対零度の計算を行うにしても有限温度の計算の  $T \rightarrow 0$  の極限をとればよい。本セミナーの目的は、現実的な計算に必要な最小限の道具を揃えることであるので、ここでは初めから有限温度のグリーン関数を導入する。

熱平衡状態における任意の演算子  $\hat{X}$  の期待値は、

$$\langle \hat{X} \rangle = \frac{\text{Tr} \left[ e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} \hat{X} \right]}{\text{Tr} \left[ e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} \right]} \quad (6)$$

で与えられる<sup>4</sup>。 $\mu$ は化学ポテンシャル、 $\beta = 1/k_B T$ は温度の逆数で、系の熱力学的な状態は巨視的変数  $\mu$  および  $\beta$  によって決められる。 $\text{Tr}$  は対角和を表し、完全系をなす状態についての和を意味する  $\text{Tr}[\dots] = \sum_n \langle n | \dots | n \rangle$ 。グリーン関数は生成・消滅演算子の期待値で表されるので、例えば次のような期待値を考えることになる(上式の  $\hat{X}$  として  $\psi\psi^\dagger$  を代入)：

$$\frac{\text{Tr} \left[ e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} \psi(t) \psi^\dagger(t') \right]}{\text{Tr} \left[ e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} \right]} \quad (7)$$

ここで  $\hat{X}(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{X}(0) e^{-i\hat{H}t/\hbar}$  は時間依存性を含んだハイゼンベルグ表示での演算子である<sup>5</sup>。

多くの場合、ハミルトニアンは厳密に解ける部分とそうでない部分に分けられ、後者を摂動として扱う。摂動項を級数展開する際に、有限温度の場合  $\exp(\pm i\hat{H}t/\hbar)$  と  $\exp(-\beta\hat{H})$  の二カ所まで級数展開が求められるため計算は非常に複雑になる<sup>6</sup>。

Time ordered (もしくは Causal) グリーン関数に現れる  $T$  は通常の時間順序積。Contour ordered (もしくは非平衡、Keldysh) グリーン関数に現れる  $T_C$  は時間順序ではなく、経路順に演算子を並べる。Retarded, Advanced グリーン関数では  $\{A, B\} = AB + BA$  を用いて表記してある。

<sup>4</sup>熱力学ポテンシャル  $\Omega$  を用いれば、 $\langle \dots \rangle = \text{Tr}[\dots e^{-\beta(\hat{H}-\Omega)}]$  が熱平衡状態での期待値となる。分配関数は  $Z = \text{Tr} e^{-\beta\hat{H}} = e^{-\beta\Omega}$  である。ただし  $\hat{H} = \hat{H} - \mu\hat{N}$  とした。

<sup>5</sup>演算子  $e^{i\hat{H}t/\hbar}$  は  $1 + i\hat{H}t/\hbar + \dots + (1/n!) (i\hat{H}t/\hbar)^n + \dots$  を記号的に表したものである。

<sup>6</sup>絶対零度の場合は  $e^{i\hat{H}t}$  の部分を級数展開するだけでよい。これは散乱行列 (S 行列) を用いて行われる。

松原はこれを一つにまとめて行う「虚時間」を用いた画期的な技法を提案した<sup>8)</sup>。例えば時間変数を複素数にまで拡張すれば、ハイゼンベルグ演算子の時間因子は  $\exp(\pm\beta\hat{H})$  となり、統計平均をとる因子と共通となる。虚時間という少し慣れない概念が登場するが、この技法により有限温度の場合においても、それまでに開発されてきた絶対温度における場の量子論の方法と同じように議論することが可能となった。このため、有限温度のグリーン関数は松原グリーン関数ともよばれる。

### 3.1 温度グリーン関数の定義

温度グリーン関数は次のように定義される。

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \tau_1; \mathbf{r}_2, \tau_2) = -\langle T_\tau \{ \psi_\alpha(\mathbf{r}_1, \tau_1) \bar{\psi}_\beta(\mathbf{r}_2, \tau_2) \} \rangle \quad (8)$$

ここで  $T_\tau\{\dots\}$  は虚時間についての時間順序積 (T 積などともよばれる) で、これが演算子に作用すれば (虚時間での) 時刻の最も早い演算子が右側に、そこから左へと時刻が進むように演算子が並び変わる。このときフェルミ粒子同士を交換する際には、 $P$  回の交換で  $(-1)^P$  が付くことを約束としておく。例えば次のようになる。

$$T_\tau \{ \psi(1) \psi(1') \} = \begin{cases} \psi(1) \psi(1') & \text{for } \tau_1 > \tau_1' \\ \pm \psi(1') \psi(1) & \text{for } \tau_1 < \tau_1' \end{cases} \quad (9)$$

符号の上がボーズ粒子、下がフェルミ粒子に対応している。

ここで注意が必要なのは、虚時間におけるハイゼンベルグ表示では

$$\psi(\mathbf{r}, \tau) = e^{\tau\hat{H}} \psi(\mathbf{r}) e^{-\tau\hat{H}} \quad (10)$$

$$\bar{\psi}(\mathbf{r}, \tau) = e^{\tau\hat{H}} \psi^\dagger(\mathbf{r}) e^{-\tau\hat{H}} \quad (11)$$

となるため、 $\psi$  と  $\bar{\psi}$  は互いにエルミート共役ではない点である。このことを注意喚起するため、 $\psi^\dagger$  ではなく  $\bar{\psi}$  という表記を用いている。エルミート共役や複素共役をとる際に、このことをすっかり忘れてしまうと、深刻な計算間違いをすることになる。

### 3.2 温度グリーン関数のフーリエ展開

ところで  $T = 0$  での場の量子論の方法における成功の大きな要因は、フーリエ展開を用いることで計算が大幅に自動化されたことにあった。松原形式では上のように通常的时间  $t$  の代わりに虚時間  $\tau$  を導入する必要がある、これが単純なフーリエ展開を阻み、計算の自動化が達成されない。この問題に対しては、虚時間軸上の周期構造をうまく使うことでフーリエ展開できることが江沢・友沢・梅沢<sup>11)</sup> およびアプリコソフ・ゴリコフ・ジャロシンスキー<sup>9)</sup> によって独立に示された<sup>7)</sup>。これによりいよいよ温度グリーン関数を用いて“自動的”に摂動計算が行えるようになった。

対角和の巡回不変性 ( $\text{Tr}\{ABC\} = \text{Tr}\{BCA\}$ ) を用いれば、 $\tau_1 > \tau_2$  の場合、

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \tau_1; \mathbf{r}_2, \tau_2) \\ = -\text{Tr}\left[e^{-\beta(\hat{H}-\Omega)} e^{(\tau_1-\tau_2)\hat{H}} \psi_\alpha(\mathbf{r}_1) e^{-(\tau_1-\tau_2)\hat{H}} \psi_\beta^\dagger(\mathbf{r}_2)\right] \end{aligned} \quad (12)$$

を得る<sup>8)</sup>。これより、右辺は虚時間の差  $\tau_1 - \tau_2$  のみに依存することが分かる。(  $\tau_1 < \tau_2$  の場合も同様。 ) とすれば、片方の虚時間を原点に取り直して

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \tau; \mathbf{r}_2, 0) = -\langle T_\tau \{ \psi_\alpha(\mathbf{r}_1, \tau) \bar{\psi}_\beta(\mathbf{r}_2, 0) \} \rangle \quad (13)$$

としても一般性は失われない。 $-\beta < \tau < 0$  の場合について再び巡回不変性を用いれば虚時間軸上の(やや特殊な)周期境界条件が示される<sup>9)</sup>

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\tau) = \pm \mathcal{G}_{\alpha\beta}(\tau + \beta). \quad (14)$$

この関係を利用して、温度グリーン関数を次のよ

<sup>7)</sup>温度グリーン関数をフーリエ展開する試みは初め江沢らによって達成された。アプリコソフらは当初江沢らの仕事を認識せずに虚時間のフーリエ展開にたどり着いたようであるが、ハラニコフによって江沢らの仕事を教えられたとのことである<sup>9)</sup>。ただし(14)の簡明な形で境界条件を与えたのはアプリコソフらが初めてである。

<sup>8)</sup>次の交換

$$e^{-\tau_2 \hat{H}} e^{-\beta(\hat{H}-\Omega)} = e^{-\beta(\hat{H}-\Omega)} e^{-\tau_2 \hat{H}}$$

は同じ演算子  $\hat{H}$  同士の交換であるので許される ( $\Omega$  は演算子ではない。)

<sup>9)</sup>虚時間に対する周期境界条件は次のようにして示すことが

うにフーリエ展開することができる：

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \tau) = \frac{1}{(2\pi)^3 \beta} \sum_n \int d\mathbf{p} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - i\varepsilon_n \tau} \mathcal{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{p}, i\varepsilon_n) \quad (15)$$

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{p}, i\varepsilon_n) = \int d\mathbf{r} \int_0^\beta d\tau e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} + i\varepsilon_n \tau} \mathcal{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \tau) \quad (16)$$

ここでは空間的に一様で外場のない無限系を想定しているので、グリーン関数は座標の差  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$  のみに依存することを用いている。(15)や(16)は一見よくあるフーリエ展開の形だが、虚時間軸上のやや特殊な周期構造(14)を反映し、振動数  $\varepsilon_n$  はボーズ粒子の場合とフェルミ粒子の場合で異なり、それぞれ  $2\pi/\beta$  の偶数倍と奇数倍で定義されている<sup>10)</sup>：

$$\varepsilon_n = \begin{cases} 2n\pi k_B T & (\text{ボーズ粒子}) \\ (2n+1)\pi k_B T & (\text{フェルミ粒子}) \end{cases} \quad (17)$$

できる(今は  $\tau < 0$  を考えていることに注意。)

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \tau; \mathbf{r}_2, 0) &= \langle \bar{\psi}_\beta(\mathbf{r}_2, 0) \psi_\alpha(\mathbf{r}_1, \tau) \rangle \\ &= \mp \text{Tr} \left[ e^{-\beta(\hat{H}-\Omega)} \bar{\psi}_\beta(\mathbf{r}_2) e^{\tau \hat{H}} \psi_\alpha(\mathbf{r}_1) e^{-\tau \hat{H}} \right] \\ &= \mp \text{Tr} \left[ e^{\beta\Omega} e^{\tau \hat{H}} \psi_\alpha(\mathbf{r}_1) e^{-(\tau+\beta)\hat{H}} \bar{\psi}_\beta(\mathbf{r}_2) \right] \\ &= \mp \text{Tr} \left[ e^{-\beta(\hat{H}-\Omega)} e^{(\tau+\beta)\hat{H}} \psi_\alpha(\mathbf{r}_1) e^{-(\tau+\beta)\hat{H}} \bar{\psi}_\beta(\mathbf{r}_2) \right] \\ &= \pm \mathcal{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \tau + \beta; \mathbf{r}_2, 0) \end{aligned}$$

<sup>10)</sup> $-\beta \leq \tau \leq \beta$  で定義された関数  $f(\tau)$  をフーリエ展開すると

$$\begin{aligned} f(\tau) &= \beta^{-1} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-in\pi\tau/\beta} f(i\varepsilon_n) \\ f(i\varepsilon_n) &= \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} d\tau f(\tau) e^{in\pi\tau/\beta} \end{aligned}$$

となる。 $-\beta < \tau < 0$  において  $f(\tau) = \pm f(\tau + \beta)$  の関係を満たしていれば、積分範囲を分割して

$$\begin{aligned} f(i\varepsilon_n) &= \frac{1}{2} \left[ \int_{-\beta}^0 d\tau f(\tau) e^{in\pi\tau/\beta} + \int_0^\beta d\tau f(\tau) e^{in\pi\tau/\beta} \right] \\ &= \frac{1}{2} (1 \pm e^{-in\pi}) \int_0^\beta d\tau f(\tau) e^{in\pi\tau/\beta} \end{aligned}$$

を得る。ボーズ粒子(フェルミ粒子)の場合  $n$  が奇数(偶数)で、 $(1 \pm e^{-in\pi})$  の因子が0になるので、最終的にフーリエ展開は

$$\begin{aligned} f(i\varepsilon_n) &= \int_0^\beta d\tau e^{i\varepsilon_n \tau} f(\tau) \\ \varepsilon_n &= \begin{cases} 2n\pi k_B T & (\text{ボーズ粒子}) \\ (2n+1)\pi k_B T & (\text{フェルミ粒子}) \end{cases} \end{aligned}$$

と表すことができる。

このように温度グリーン関数をフーリエ展開することにより  $T = 0$  において培われてきたグリーン計算の技法がほぼそのまま有限温度においても用いられることとなり、計算が飛躍的に簡単化された。

### 3.3 自由粒子系の温度グリーン関数

温度グリーン関数が具体的にどういう形をとるのか、まずは相互作用しない多粒子系（自由粒子系）について考えてみる。自由粒子系では運動量表示において

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{p}\sigma} \varepsilon_0(\mathbf{p}) \psi_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger \psi_{\mathbf{p}\sigma} \quad (18)$$

$$\hat{N} = \sum_{\mathbf{p}\sigma} \psi_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger \psi_{\mathbf{p}\sigma} \quad (19)$$

と表せる。Baker-Hausdorff の補助定理

$$e^A C e^{-A} = C + [A, C] + \frac{1}{2!} [A, [A, C]] + \frac{1}{3!} [A, [A, [A, C]]] + \dots \quad (20)$$

を用いれば演算子のハイゼンベルグ表示は次のように簡単になる：

$$\psi_{\mathbf{p}\sigma}(\tau) = e^{\tau(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})} \psi_{\mathbf{p}\sigma} e^{-\tau(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})} = e^{-\tau\xi_{\mathbf{p}}} \psi_{\mathbf{p}\sigma} \quad (21)$$

$$\bar{\psi}_{\mathbf{p}\sigma}(\tau) = e^{\tau(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})} \psi_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger e^{-\tau(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})} = e^{\tau\xi_{\mathbf{p}}} \psi_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger \quad (22)$$

ここで  $\xi_{\mathbf{p}} = \varepsilon_0(\mathbf{p}) - \mu$  とした。これらと階段関数  $\theta(\tau)$  を用いて自由粒子系の温度グリーン関数は

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_0(\mathbf{p}, \tau) &= -\theta(\tau) e^{-\xi_{\mathbf{p}}\tau} \langle \psi_{\mathbf{p}\sigma} \psi_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger \rangle + \theta(-\tau) e^{-\xi_{\mathbf{p}}\tau} \langle \psi_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger \psi_{\mathbf{p}\sigma} \rangle \\ &= -e^{-\xi_{\mathbf{p}}\tau} [\theta(\tau) (1 \pm n_{\mathbf{p}}) - \theta(-\tau) n_{\mathbf{p}}] \end{aligned} \quad (23)$$

と書ける。ここで  $n_{\mathbf{p}} = \langle \psi_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger \psi_{\mathbf{p}\sigma} \rangle$  は粒子密度演算子の期待値で、自由粒子系の場合、

$$n_{\mathbf{p}} = \begin{cases} \frac{1}{e^{\beta\xi_{\mathbf{p}}} - 1} & \text{ボーズ粒子} \\ \frac{1}{e^{\beta\xi_{\mathbf{p}}} + 1} & \text{フェルミ粒子} \end{cases} \quad (24)$$

である。ここでフーリエ展開を施すと

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_0(\mathbf{p}, i\varepsilon_n) &= -(1 \pm n_{\mathbf{p}}) \int_0^\beta d\tau e^{(i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}})\tau} \\ &= -(1 \pm n_{\mathbf{p}}) \frac{e^{\beta(i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}})} - 1}{i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}}} \\ &= (1 \pm n_{\mathbf{p}}) \frac{1 \mp e^{-\beta\xi_{\mathbf{p}}}}{i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}}} \end{aligned} \quad (25)$$

以上より、グリーン関数を運動量・振動数表示すれば非常に簡単な形

$$\mathcal{G}_0(\mathbf{p}, i\varepsilon_n) = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}}} \quad (26)$$

となることが分かる。

これがグリーン関数の基本形で、数学的には  $i\varepsilon_n$  に対する複素平面で留数 1 の 1 位の極が  $\xi_{\mathbf{p}}$  にあることになる。相互作用を含む一般の場合でもグリーン関数の極の位置が固有の励起エネルギーを与え、留数の値はその励起強度に対応する。

## 4 遅延・先進グリーン関数

前節で導入された温度グリーン関数が物理的にどういう意味を持っているのかを確かめる。そのためには、遅延および先進グリーン関数 (retarded and advanced Green's function) とよばれるグリーン関数を考える必要がある。伝導度や感受率など、すべての観測できる物理量は遅延・先進グリーン関数から（久保公式を通して）求めることができる。多くの場合、虚時間を用いた松原振動数と温度グリーン関数から計算をはじめ、そこから解析接続の手順に従って遅延・先進グリーン関数（そしてその相関関数）を得ることで物理量の計算が完了する。結論を先に言えば、温度グリーン関数の松原振動数を次のように解析性に注意して  $i\varepsilon_n \rightarrow \varepsilon \pm i\delta$  と置き換えるだけで対応する遅延・先進グリーン関数が得られる：

$$\mathcal{G}(\mathbf{p}, i\varepsilon_n) \xrightarrow{i\varepsilon_n \rightarrow \varepsilon + i\delta} G^R(\mathbf{p}, \varepsilon) \quad \text{for } \varepsilon_n > 0 \quad (27)$$

$$\mathcal{G}(\mathbf{p}, i\varepsilon_n) \xrightarrow{i\varepsilon_n \rightarrow \varepsilon - i\delta} G^A(\mathbf{p}, \varepsilon) \quad \text{for } \varepsilon_n < 0 \quad (28)$$

ここで  $\delta$  は正の無限小量である。

#### 4.1 遅延・先進グリーン関数の定義

本稿ではフェルミ粒子に限って議論を進めることとする．フェルミ粒子の遅延グリーン関数は次で定義される：

$$\begin{aligned} G^R(\mathbf{p}, t - t') &= -i\theta(t - t') \langle \psi_{\mathbf{p}\sigma}(t) \psi_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(t') + \psi_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(t') \psi_{\mathbf{p}\sigma}(t) \rangle \\ &\quad (29) \end{aligned}$$

遅延グリーン関数は実時間  $t$  で与えられている点で温度グリーン関数と大きく異なるが、生成・消滅演算子の対の熱平衡状態の平均値という点では同等である（虚数  $i$  が係数についている点も温度グリーン関数と異なっている．）階段関数  $\theta(t - t')$  は因果律と対応している．すなわち、時刻  $t'$  に擾乱を加え、その変化があとの時刻  $t$  で観測される．観測はこの因果律を満たしているはずで、それゆえ観測量が遅延および先進グリーン関数と結びつけられる． $\langle \dots \rangle$  の中をみれば明らかなように、遅延グリーン関数は異なる時刻の反交換関係と対応している<sup>11</sup>．同様に、先進グリーン関数は次式で与えられる：

$$\begin{aligned} G^A(\mathbf{p}, t - t') &= i\theta(t' - t) \langle \psi_{\mathbf{p}\sigma}(t) \psi_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(t') + \psi_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger(t') \psi_{\mathbf{p}\sigma}(t) \rangle \\ &\quad (30) \end{aligned}$$

考えているハミルトニアン  $\hat{H}$  の固有値と固有状態を  $\hat{H}|m\rangle = E_m|m\rangle$  で表すことにすると、

$$\begin{aligned} G^R(t - t') &= -i\theta(t - t') e^{\beta\Omega} \\ &\times \sum_n \langle n | e^{-\beta\hat{H}} \{ \psi(t) \psi^\dagger(t') + \psi^\dagger(t') \psi(t) \} | n \rangle \\ &= -i\theta(t - t') e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} e^{-\beta E_n} \\ &\times \left\{ \langle n | \psi(t) | m \rangle \langle m | \psi^\dagger(t') | n \rangle + \langle n | \psi^\dagger(t') | m \rangle \langle m | \psi(t) | n \rangle \right\} \\ &\quad (31) \end{aligned}$$

と表すことができる<sup>12</sup>．ここでは完備関係式  $\sum_m |m\rangle \langle m| = 1$  を用いている．ハイゼンベルグ

<sup>11</sup>ボーズ粒子の場合は交換関係を反映し、 $\langle \dots \rangle$  内の符号が負で定義される．

<sup>12</sup>運動量やスピン依存性を明記していないが、もちろんすべての生成・消滅演算子は両者に依存しており、 $\psi_{\mathbf{p},\sigma}$  である．

表示における演算子の定義を思い出せば、次の関係が成り立つこともすぐに理解できるであろう：

$$\begin{aligned} \langle n | \psi(t) | m \rangle &= \langle n | e^{i\hat{H}t} \psi(0) e^{-i\hat{H}t} | m \rangle \\ &= \langle n | \psi(0) | m \rangle e^{i(E_n - E_m)t} \end{aligned} \quad (32)$$

したがって遅延グリーン関数は次のように書き表すことができる<sup>13</sup>：

$$\begin{aligned} G^R(t - t') &= -i\theta(t - t') e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} e^{-\beta E_n} \\ &\times \left\{ e^{i(E_n - E_m)(t - t')} |\langle n | \psi | m \rangle|^2 \right. \\ &\quad \left. + e^{-i(E_n - E_m)(t - t')} |\langle m | \psi | n \rangle|^2 \right\} \\ &= -i\theta(t - t') e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}) \\ &\times e^{i(E_n - E_m)(t - t')} |\langle n | \psi | m \rangle|^2. \end{aligned} \quad (33)$$

#### 4.2 遅延・先進グリーン関数のフーリエ展開とスペクトル関数

遅延・先進グリーン関数も次のようにフーリエ展開すればより理解しやすくなる：

$$G^R(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d\mathbf{p} d\varepsilon e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - i\varepsilon t} G^R(\mathbf{p}, \varepsilon) \quad (34)$$

$$G^R(\mathbf{p}, \varepsilon) = \int d\mathbf{r} dt e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} + i\varepsilon t} G^R(\mathbf{r}, t) \quad (35)$$

(33) のフーリエ展開を導くために、階段関数の積分表示

$$\theta(t) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon'}{2\pi i} \frac{e^{i\varepsilon' t}}{\varepsilon' - i\delta} \quad (36)$$

<sup>13</sup>最後の式へと変形する際、 $\{ \dots \}$  内の第2項の  $m$  と  $n$  を入れ替えている．

を用いる ( $\delta > 0$ ) これを (33) に代入し, (35) の時間に関する部分から<sup>14</sup>,

$$\begin{aligned}
G^R(\varepsilon) &= -i \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon'}{2\pi i} \frac{e^{i(\varepsilon+\varepsilon'+E_n-E_m)t}}{\varepsilon' - i\delta} \\
&\times e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}) |\langle n|\psi|m\rangle|^2 \\
&= - \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' \frac{\delta(\varepsilon + \varepsilon' + E_n - E_m)}{\varepsilon' - i\delta} \\
&\times e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}) |\langle n|\psi|m\rangle|^2 \\
&= e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} |\langle n|\psi|m\rangle|^2 \frac{e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}}{\varepsilon + E_n - E_m + i\delta} \quad (37)
\end{aligned}$$

なお,  $G^A$  についても同様の計算で求め,  $G^R$  と複素共役の関係

$$G^A(\varepsilon) = [G^R(\varepsilon)]^* \quad (38)$$

にあることが示せるので, 余力のある読者は確かめてほしい.

遅延グリーン関数の物理的意味はスペクトル関数  $A(\mathbf{p}, \varepsilon)$  を用いることでより明確になる:

$$\begin{aligned}
G^R(\mathbf{p}, \varepsilon) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon'}{2\pi} \frac{A(\mathbf{p}, \varepsilon')}{\varepsilon - \varepsilon' + i\delta} \quad (39) \\
A(\mathbf{p}, \varepsilon) &= 2\pi e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} |\langle n|\psi_{\mathbf{p}}|m\rangle|^2 (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}) \\
&\times \delta(\varepsilon + E_n - E_m). \quad (40)
\end{aligned}$$

このようにスペクトル関数を用いた (39) 式の表示はレーマン表示とよばれる. スペクトル関数  $A(\mathbf{p}, \varepsilon)$  の形をみると, ある状態から運動量  $\mathbf{p}$  の粒子を一つ取り除いた時のエネルギー変化が  $\varepsilon$  に相当する過程の遷移確率に比例していることが分かる. 別の言い方をすれば, 粒子が運動量  $\mathbf{p}$  とエネルギー  $\varepsilon$  をとる確率を表している.

スペクトル関数と遅延グリーン関数の関係は (39) 式により,

$$A(\mathbf{p}, \varepsilon) = -2 \text{Im} G^R(\mathbf{p}, \varepsilon) \quad (41)$$

<sup>14</sup>階段関数に現れる  $\varepsilon'$  とフーリエ展開で現れる  $\varepsilon$  を混同しないように注意が必要である. さらに次のデルタ関数の関係式

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\varepsilon t} = 2\pi\delta(\varepsilon)$$

も用いている. これはフーリエ展開のいたるところで現れる重要な積分である.  $2\pi$  を忘れることがあるので注意.

と表すこともできる. これは実数の  $x$  に対して一般に

$$\frac{1}{x \pm i\delta} = P \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x) \quad (42)$$

のように表されることから導ける. 記号  $P$  はコーシーの主値を表している.

その形から明らかなように,  $A(\mathbf{p}, \varepsilon)$  はすべての  $\mathbf{p}, \varepsilon$  に対して常に正である. また, スペクトル関数についての総和則

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} A(\mathbf{p}, \varepsilon) = 1 \quad (43)$$

が成り立っている<sup>15</sup>.

スペクトル関数は, 具体的には光電子分光法により測定される. 光電子分光では, 光 (フォトン) を物質に照射し, 飛び出してきた光電子の運動エネルギーを測定する. このエネルギー分布が光電子スペクトルであり, スペクトル関数  $A(\varepsilon)$  そのものである. 特定の方向に飛び出してきた光電子を観測すれば角度分解光電子分光となり, スペクトル関数の運動量依存性  $A(\mathbf{p}, \varepsilon)$  も明らかにできる. 光電子分光は銅酸化物高温超伝導の出現を契機に大きく発展した実験技術であり, 物性物理学における主要な実験の一つに数えられるようになった. 固体のバンド構造およびフェルミ面を直接的に観測し, 貴重な情報をもたらす光電子分光は, グリーン関数と直に結びついている.

遅延グリーン関数は他に粒子数密度の情報も含んでいる. 粒子数密度は

$$n_{\mathbf{p}} = \langle \psi_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger \psi_{\mathbf{p}\sigma} \rangle \quad (44)$$

で与えられる. 相互作用がない場合にこれはフェルミ分布関数に一致することはすでに述べた. —

<sup>15</sup>全振動数領域での積分を考え, (31) 式での変形の逆をたどれば,

$$\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} A(\mathbf{p}, \varepsilon) \\
&= e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} |\langle n|\psi_{\mathbf{p}}|m\rangle|^2 (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}) \\
&= e^{\beta\Omega} \sum_n \langle n| (\psi_{\mathbf{p}}\psi_{\mathbf{p}}^\dagger + \psi_{\mathbf{p}}^\dagger\psi_{\mathbf{p}}) |n\rangle e^{-\beta E_n} \\
&= e^{\beta\Omega} \sum_n e^{-\beta E_n}.
\end{aligned}$$

本来  $Z = e^{-\beta\Omega} = \text{Tr} e^{-\beta\hat{H}} = \sum_n e^{-\beta E_n}$  であったので, この分配関数部分はちょうど打ち消され, 総和則が導かれる.



方，相互作用がある場合はフェルミ分布関数からずれる．粒子数密度を次のように表すと，スペクトル関数と似た形が得られる：

$$\begin{aligned} n_{\mathbf{p}} &= e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} \langle m | e^{-\beta\hat{H}} \psi_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger | n \rangle \langle n | \psi_{\mathbf{p}\sigma} | m \rangle \\ &= e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} e^{-\beta E_m} |\langle n | \psi_{\mathbf{p}\sigma} | m \rangle|^2 \end{aligned} \quad (45)$$

この粒子数密度をスペクトル関数 (40) を用いて書き直すと，

$$\begin{aligned} &(e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}) \delta(\varepsilon + E_n - E_m) \\ &= e^{-\beta E_m} (e^{\beta\varepsilon} + 1) \delta(\varepsilon + E_n - E_m) \end{aligned} \quad (46)$$

であることから，スペクトル関数を  $e^{\beta\varepsilon} + 1$  で除したものが粒子数密度に相当することが分かる：

$$n_{\mathbf{p}} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} \frac{A(\mathbf{p}, \varepsilon)}{e^{\beta\varepsilon} + 1} \quad (47)$$

したがって，粒子数密度はフェルミ分布関数  $n_{\text{F}}(\varepsilon) = (e^{\beta\varepsilon} + 1)^{-1}$  (エネルギーは化学ポテンシャルを基準としている) とスペクトル関数によって表される．

$$n_{\mathbf{p}} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} n_{\text{F}}(\varepsilon) A(\mathbf{p}, \varepsilon) \quad (48)$$

つまり，運動量  $\mathbf{p}$  を持つ粒子の密度は，フェルミ分布関数にその重みとしてスペクトル関数を乗じた上，全エネルギーで積分したもので与えられる<sup>16</sup>．スペクトル関数は遅延グリーン関数と (41) に直結していることから，遅延グリーン関数が求まれば直ちに粒子数密度を求めることができる．

### 4.3 自由粒子系の遅延グリーン関数とスペクトル関数

相互作用しない系の遅延グリーン関数とスペクトル関数は簡単に求めることができる．(29) の定義より，

$$\begin{aligned} G_0^{\text{R}}(\mathbf{p}, t - t') &= -i\theta(t - t') e^{-i(t-t')\xi_{\mathbf{p}}} \langle \psi_{\mathbf{p}\sigma} \psi_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger + \psi_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger \psi_{\mathbf{p}\sigma} \rangle \\ &= -i\theta(t - t') e^{-i(t-t')\xi_{\mathbf{p}}} \end{aligned} \quad (49)$$

<sup>16</sup> すぐ後でみるように，自由粒子系ではスペクトル関数はデルタ関数となる．これに応じて  $n_{\mathbf{p}}$  は自由粒子系では  $n_{\text{F}}$  に一致することが (48) から直ちに分かる．

相互作用がなければ運動量  $\mathbf{p}$  を持つ粒子のエネルギーは変化しないため，その存在確率はデルタ関数に

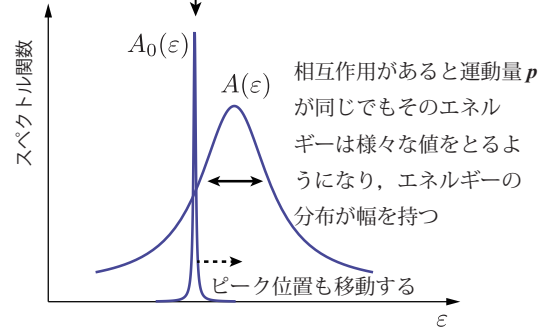


図 3: 相互作用がない場合  $A_0(\varepsilon)$  とある場合  $A(\varepsilon)$  のスペクトル関数．相互作用のある場合のスペクトル関数については，8.2 節参照 (注：上図ではスペクトルの幅を強調して描いているが，実際には総和則 (43) が成り立ち， $A_0(\varepsilon)$  と  $A(\varepsilon)$  の積分値は等しい.)

となる．ここで温度グリーン関数の時と同様に Baker-Hausdorff の補助定理より  $\psi_{\mathbf{p}\sigma}(t) = e^{-it\xi_{\mathbf{p}}} \psi_{\mathbf{p}\sigma}$  を用いた．このフーリエ展開は，(37) と同様にして

$$G_0^{\text{R}}(\mathbf{p}, \varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - \xi_{\mathbf{p}} + i\delta} \quad (50)$$

となる．自由粒子系の温度グリーン関数 (26) と比べれば，遅延グリーン関数は確かに  $i\varepsilon_n \rightarrow \varepsilon + i\delta$  の置き換えを行ったものになっていることが分かる．このとき，スペクトル関数は (41) を用いて

$$A_0(\mathbf{p}, \varepsilon) = 2\pi\delta(\varepsilon - \xi_{\mathbf{p}}) \quad (51)$$

である．すでに述べたようにスペクトル関数は，存在確率に対応している．自由粒子系の場合，運動量  $\mathbf{p}$  の粒子のとりうるエネルギーは  $\xi_{\mathbf{p}}$  のみであり，そのため確率密度はデルタ関数となる．系に相互作用がある場合，運動量  $\mathbf{p}$  を持つ粒子のとりうるエネルギーは  $\xi_{\mathbf{p}}$  にとどまらないことから，スペクトル関数の幅が広がる (図 3) ．

## 5 グリーン関数と運動方程式

前節でグリーン関数が様々な情報を含んでいることをみた．ひとたびグリーン関数が得られれば，こうした情報を引き出すことができる．ではそのグリーン関数を具体的に求めるにはどうすれば良いか．ここでは運動方程式からグリーン関数を求める方法を紹介する．

### 5.1 消滅演算子の運動方程式

次のように運動エネルギーと二体ポテンシャル  $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  からなるハミルトニアンを考える：

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int d\mathbf{r} \bar{\psi}(\mathbf{r}) \frac{(-\nabla^2)}{2m} \psi(\mathbf{r}) \\ & + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \bar{\psi}(\mathbf{r}) \bar{\psi}(\mathbf{r}') V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (52)$$

$V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  は瞬間的に2粒子間に作用するものとし，時間には依存しない．粒子のスピンをあらわには書いていないが，必要があれば  $\psi(\mathbf{r})$  は  $\psi_\sigma(\mathbf{r})$  とみなし， $\mathbf{r}$  についての積分に加えて  $\sigma$  についての和をとることにしておく．なお， $\hbar = 1$  とした．

ハイゼンベルグの運動方程式は任意の演算子  $X(t)$  (ハイゼンベルグ表示) に対して，

$$i \frac{\partial X(t)}{\partial t} = [X(t), \hat{H}(t)] \quad (53)$$

与えられる．我々は演算子として  $\psi(\tau)$  を考え， $\tau = it$  の虚時間で表記し，次の運動方程式を考える：

$$-\frac{\partial \psi(\tau)}{\partial \tau} = [\psi(\tau), \hat{H}(\tau)] \quad (54)$$

右辺のような交換子の計算は頻繁にでてくるので，ここで一度計算の詳細をみておく．ハミルトニアン (52) の第一項を  $\hat{H}_0$ ，第二項を  $\hat{H}'$  として，それぞれの交換子を計算する．

$$\begin{aligned} [\psi(\tau), \hat{H}_0] = & -\psi(\mathbf{r}_1, \tau) \int d\mathbf{r}_2 \bar{\psi}(\mathbf{r}_2, \tau) \frac{\nabla^2}{2m} \psi(\mathbf{r}_2, \tau) \\ & + \int d\mathbf{r}_2 \bar{\psi}(\mathbf{r}_2, \tau) \frac{\nabla^2}{2m} \psi(\mathbf{r}_2, \tau) \psi(\mathbf{r}_1, \tau) \end{aligned} \quad (55)$$

ここで  $\nabla_i$  は  $\mathbf{r}_i$  にのみ演算する．上の第二項はフェルミ粒子の交換関係を用いて

$$\begin{aligned} & \bar{\psi}(\mathbf{r}_2, \tau) \frac{\nabla^2}{2m} \psi(\mathbf{r}_2, \tau) \psi(\mathbf{r}_1, \tau) \\ = & -\bar{\psi}(\mathbf{r}_2, \tau) \psi(\mathbf{r}_1, \tau) \frac{\nabla^2}{2m} \psi(\mathbf{r}_2, \tau) \\ = & -\{\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) - \psi(\mathbf{r}_1) \bar{\psi}(\mathbf{r}_2)\} \frac{\nabla^2}{2m} \psi(\mathbf{r}_2, \tau) \end{aligned} \quad (56)$$

となるので，後ろの部分は (55) の第一項と打ち消し合うことになる．結局残るのはデルタ関数のついている項で， $\mathbf{r}_2$  積分を行って，

$$[\psi(\tau), \hat{H}_0] = -\frac{\nabla^2}{2m} \psi(\mathbf{r}, \tau) \quad (57)$$

となる．このように演算子の交換子の計算がでてきた場合， $\psi_1 \bar{\psi}_2 \psi_2 - \bar{\psi}_2 \psi_2 \psi_1$  のような形が現れるが，第二項の右端にある  $\psi_1$  をフェルミ粒子の交換関係を用いて左端まで持ってくることで，第一項を打ち消す，というのが計算の基本方針である．途中で  $[\psi_1, \bar{\psi}_2]_+ = \delta(1-2)$  を用いた分だけデルタ関数が現れ，これが最後まで残る．この基本方針さえ心に留めておけば，計算が複雑になっても機械的に計算を行えば良い．それを次の  $[\psi(\tau), \hat{H}']$  でみてみよう．

$$\begin{aligned} [\psi(\tau), \hat{H}'] = & \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 [\psi_1 \bar{\psi}_2 \bar{\psi}_3 V(2-3) \psi_3 \psi_2 \\ & - \bar{\psi}_2 \bar{\psi}_3 V(2-3) \psi_3 \psi_2 \psi_1] \end{aligned} \quad (58)$$

右辺第二項は

$$\begin{aligned} & -\bar{\psi}_2 \bar{\psi}_3 V(2-3) \psi_3 \psi_2 \psi_1 = -\bar{\psi}_2 \bar{\psi}_3 V(2-3) \psi_1 \psi_3 \psi_2 \\ = & -\bar{\psi}_2 \{\delta(3-1) - \psi_1 \bar{\psi}_3\} V(2-3) \psi_3 \psi_2 \\ = & -\bar{\psi}_2 V(2-1) \psi_1 \psi_2 + \{\delta(2-1) - \psi_1 \bar{\psi}_2\} \bar{\psi}_3 V(2-3) \psi_3 \psi_2 \\ = & \bar{\psi}_2 V(2-1) \psi_2 \psi_1 + \bar{\psi}_3 V(1-3) \psi_3 \psi_1 \\ & - \psi_1 \bar{\psi}_2 \bar{\psi}_3 V(2-3) \psi_3 \psi_2 \end{aligned} \quad (59)$$

となる．この第三項は (58) の第一項と打ち消すので，残るのは

$$[\psi(\tau), \hat{H}'] = \int d\mathbf{r}' \bar{\psi}(\mathbf{r}') V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}) \quad (60)$$

である．したがって考えていた運動方程式は次のようになる：

$$-\frac{\partial}{\partial \tau} \psi(\mathbf{r}, \tau) = -\frac{\nabla^2}{2m} \psi(\mathbf{r}, \tau) + \int d\mathbf{r}' \bar{\psi}(\mathbf{r}', \tau) V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}', \tau) \psi(\mathbf{r}, \tau). \quad (61)$$

## 5.2 グリーン関数の運動方程式

上の運動方程式を元にして温度グリーン関数についての運動方程式を立てることができる．温度グリーン関数の定義 (8) を階段関数を用いて表記すると，

$$\mathcal{G}(1, 1') = -\theta(\tau_1 - \tau_1') \langle \psi(1) \bar{\psi}(1') \rangle + \theta(\tau_1' - \tau_1) \langle \bar{\psi}(1') \psi(1) \rangle \quad (62)$$

である．この温度グリーン関数の  $\tau_1$  について虚時間微分をとる：

$$\begin{aligned} \partial_{\tau_1} \mathcal{G}(1, 1') &= -\delta(\tau_1 - \tau_1') \langle [\psi(1), \bar{\psi}(1')] \rangle - \langle T_{\tau} \{ \partial_{\tau_1} \psi(1) \bar{\psi}(1') \} \rangle \\ &= -\delta(1 - 1') - \frac{\nabla_1^2}{2m} \langle T_{\tau} \{ \psi(1) \bar{\psi}(1') \} \rangle \\ &+ \int d\mathbf{r}_2 V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \langle T_{\tau} \{ \bar{\psi}(2) \psi(2) \psi(1) \bar{\psi}(1') \} \rangle \Big|_{\tau_1 = \tau_2} \end{aligned} \quad (63)$$

階段関数の微分はデルタ関数になることを用いている．また上の右辺第一項ではフェルミ粒子の交換関係を考慮して  $\delta(1 - 1') = \delta(\tau_1 - \tau_1') \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1')$  としてある．ここで次の関数を導入する．

$$\mathcal{G}_2(12; 1'2') = \langle T_{\tau} \{ \psi(1) \psi(2) \bar{\psi}(2') \bar{\psi}(1') \} \rangle \quad (64)$$

$\mathcal{G}_2$  は 2 粒子の生成・消滅に関係したグリーン関数なので，2 粒子グリーン関数と呼ぶ．これを用いてグリーン関数の運動方程式は次のようになる：

$$\begin{aligned} \left[ \frac{\partial}{\partial \tau_1} - \frac{\nabla_1^2}{2m} \right] \mathcal{G}(1, 1') &= -\delta(1 - 1') \\ - \int d\mathbf{r}_2 V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \mathcal{G}_2(12; 1'2^+) \Big|_{\tau_1 = \tau_2} &. \end{aligned} \quad (65)$$

ここで  $2^+$  は  $\tau_2$  より無限小だけ大きな時刻を表し， $\mathcal{G}_2$  の中の時間順序積と (61) の順序とが一致するようになっていいる．

このように 1 粒子グリーン関数の運動方程式は 2 粒子グリーン関数によって与えられる．同様に 2 粒子グリーン関数は 3 粒子，3 粒子は 4 粒子グリーン関数によって記述され，無限に階層的な構造を持つ．したがって高次のグリーン関数を得ない限りその低次のグリーン関数は求まらないこととなる．一般に厳密な多粒子グリーン関数を求めるのは困難であるため，実際には (65) において  $\mathcal{G}_2$  に適当な近似を施すことによって  $\mathcal{G}$  の近似解を求めることになる．

## 5.3 自由粒子系の運動方程式

$\mathcal{G}_2$  に対する近似を考える前に，得られた運動方程式から自由粒子系の温度グリーン関数を計算しておく．自由粒子系での運動方程式は単純に

$$\left[ \frac{\partial}{\partial \tau_1} - \frac{\nabla_1^2}{2m} \right] \mathcal{G}_0(1, 1') = -\delta(1 - 1') \quad (66)$$

である．この方程式はフーリエ展開すれば簡単に解くことができる．両辺に  $\exp[-i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1') + i\varepsilon_n(\tau_1 - \tau_1')]$  をかけて  $\mathbf{r}_1, \tau_1$  について積分すると<sup>17</sup>

$$\int_0^{\beta} d\tau_1 e^{i\varepsilon_n(\tau_1 - \tau_1')} \frac{\partial}{\partial \tau_1} \mathcal{G}_0(1, 1') = -i\varepsilon_n \mathcal{G}_0(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1', i\varepsilon_n) \quad (67)$$

$$\int d\mathbf{r}_1 e^{-i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1')} \nabla_1^2 \mathcal{G}_0(1, 1') = -p^2 \mathcal{G}_0(\mathbf{p}, \tau_1 - \tau_1') \quad (68)$$

となることから，

$$\mathcal{G}_0(\mathbf{p}, i\varepsilon_n) = \frac{1}{i\varepsilon_n - p^2/2m} \quad (69)$$

となり，(26) に相当する結果が得られる．上の結果から，

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \rightarrow -i\varepsilon_n \quad (70)$$

$$\nabla^2 \rightarrow -p^2 \quad (71)$$

の対応があることを覚えておくと良い．

<sup>17</sup>(67) と (68) では部分積分を用いる． $\tau_1$  積分では境界条件 (14) を， $\mathbf{r}_1$  積分では  $\mathcal{G}_0(1, 1')|_{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1' \rightarrow \pm\infty} = 0$  を用いる．残った積分はフーリエ展開 (16) の形をとる．

この対応関係を用いれば，自由粒子系に限らず一般に (63) は

$$\mathcal{G}(1, 1') = \left\langle 1 \left| \frac{1}{i\varepsilon_n - \hat{H}} \right| 1' \right\rangle \quad (72)$$

と表すこともできる．ここで  $\hat{H}$  は一般には行列で与えられ， $1/(i\varepsilon_n - \hat{H})$  は正確には逆行列  $(i\varepsilon_n - \hat{H})^{-1}$  と解釈する必要がある． $\hat{H}_0$  を対角化する表示として運動量空間を考え，それに対応する固有エネルギーが  $p^2/2m$  であると見なせば，(69) と一致することが分かるであろう．次回以降で紹介する具体的な計算の場合は，(72) の定義から出発した方が簡単なことが多い．

またこの形から，ハミルトニアンを持つエネルギースケールより十分に大きい  $i\varepsilon_n$  に対しては，

$$\mathcal{G} \rightarrow \frac{\delta_{1,1'}}{i\varepsilon_n} \quad (73)$$

になることが分かる．このことはハミルトニアンに含まれる相互作用の詳細にかかわらず，高いエネルギーのグリーン関数は一般に自由粒子系と等しくなることを意味する．換言すれば，エネルギーが高い粒子は，それに比べて低いエネルギーの相互作用など気にせず自由に振舞っていると理解することができる．

## 6 ハートリー・フォック近似

前節最後で触れた  $\mathcal{G}_2$  に対する近似の最も基本的な例としてハートリー近似およびハートリー・フォック近似を紹介する．近似の構造や特徴はファインマン図形を用いて考察すると直感的に理解しやすくなる．まず 1 粒子グリーン関数は方向を持った 1 本の直線で下のよう表す．

$$\mathcal{G}(1, 1') = \begin{array}{c} \longrightarrow \\ 1' \qquad \qquad \qquad 1 \end{array}$$

これは  $(r_{1'}, \tau_{1'})$  で粒子を付け加え， $(r_1, \tau_1)$  に粒子を取り除くことを表している．同様に 2 粒子グリーン関数は次のように表される．

$$\mathcal{G}_2(12; 1'2') = \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} 1' & \longrightarrow & 1 \\ & | & \\ & \mathcal{G}_2 & \\ & | & \\ 2' & \longrightarrow & 2 \end{array} \end{array}$$

ここで付け加えられた 2 粒子は直接的に，あるいは他の粒子を通して間接的に相互作用しあっている．しかし最も単純な近似として，ここでの相互作用を無視してみる．その場合は 2 粒子は互いに独立で，ファインマン図形で表現すれば

$$\begin{array}{c} \begin{array}{ccc} 1' & \longrightarrow & 1 \\ & | & \\ & \mathcal{G}_2 & \\ & | & \\ 2' & \longrightarrow & 2 \end{array} \approx \begin{array}{ccc} 1' & \longrightarrow & 1 \\ & & \\ & & \\ & & \\ 2' & \longrightarrow & 2 \end{array} \end{array}$$

のようになることから，

$$\mathcal{G}_2(12, 1'2') \simeq \mathcal{G}(1, 1')\mathcal{G}(2, 2') \quad (74)$$

となることは一目瞭然である．

このようにして得た近似的な 2 粒子グリーン関数をグリーン関数の運動方程式 (65) に代入すると，

$$\left[ \frac{\partial}{\partial \tau_1} - \frac{\nabla_1^2}{2m} + \int dr_2 V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \mathcal{G}(2, 2^+) \right]_{\tau_2 = \tau_1} \times \mathcal{G}(1, 1') = -\delta(1 - 1') \quad (75)$$

となる． $\mathcal{G}(2, 2^+)$  は粒子数密度  $n(\mathbf{r}_2)$  に対応しており，(75) はある粒子が他の粒子からの相互作用を平均化したポテンシャルを感じながら  $1' \rightarrow 1$  へと至る経緯を表している．これはいわゆるハートリー近似に相当している．

並進不変性がある場合， $\mathcal{G}(2, 2^+)$  は位置に依存せず一様なので，これを  $n$  とおける．これにより  $nV_0 = \int dr_2 V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \mathcal{G}(2, 2^+)$  とすることができるとして，(75) のフーリエ展開は (69) と同様の方法で得られ，

$$\mathcal{G}(\mathbf{p}, i\varepsilon_n) = \frac{1}{i\varepsilon_n - p^2/2m - nV_0} \quad (76)$$

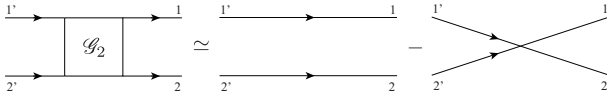
となる．解析接続  $i\varepsilon_n \rightarrow \varepsilon + i\delta$  を施せば，

$$G^R(\mathbf{p}, \varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - p^2/2m - nV_0 + i\delta} \quad (77)$$

$$A(\mathbf{p}, \varepsilon) = 2\pi\delta(\varepsilon - p^2/2m - nV_0) \quad (78)$$

が得られる．以上より，ハートリー近似のもとでは粒子間の相互作用は単に全体のエネルギーをシフトさせる（化学ポテンシャルのくりこみ）だけとなる．これは1粒子が他の粒子の影響を平均化したポテンシャル中にある場合と考えることができる．

量子力学的には，2粒子(1', 2')が(1, 2)へと移る際に，(1' → 1; 2' → 2)と(1' → 2; 2' → 1)とを区別できない．このことを考慮すれば，2粒子グリーン関数は



$$\mathcal{G}_2(12, 1'2') \simeq \mathcal{G}(1, 1')\mathcal{G}(2, 2') - \mathcal{G}(1, 2')\mathcal{G}(2, 1') \quad (79)$$

のように表される．負符号は1と2の交換に伴って現れた<sup>18</sup>．このように近似した2粒子グリーン関数を用いれば運動方程式は

$$\left[ \frac{\partial}{\partial \tau_1} - \frac{\nabla_1^2}{2m} \right] \mathcal{G}(1, 1') + \int d\mathbf{r}_2 U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \mathcal{G}(2, 1') \Big|_{\tau_2=\tau_1} = -\delta(1-1') \quad (80)$$

$$U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \int d\mathbf{r}_3 V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3) \mathcal{G}(3, 3^+) - V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \mathcal{G}(1, 2^+) \quad (81)$$

である．ここで導入したポテンシャル $U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ はハートリー近似の場合と同様に，他の粒子からのポテンシャルと理解することができるが，定数ではなく，位置の関数となる．この結果はいわゆるハートリー・フォック近似に相当する．

並進不変性がある場合はやはりフーリエ展開できて次の形をとる：

$$\mathcal{G}(\mathbf{p}, i\varepsilon_n) = \frac{1}{i\varepsilon_n - E(\mathbf{p})} \quad (82)$$

<sup>18</sup> 2粒子グリーン関数の定義(64)から， $\mathcal{G}_2(12; 1'2') = \pm \mathcal{G}_2(21; 1'2')$ となることは自明で，第2項の符号もこれと対応している．したがってボーズ粒子の場合は正符号となる

$$E(\mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m} + nV_0 - \frac{1}{(2\pi)^3\beta} \sum_{n'} \int d\mathbf{p}' V(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \mathcal{G}(\mathbf{p}', i\varepsilon'_n) \quad (83)$$

$$A(\mathbf{p}, \varepsilon) = 2\pi\delta(\varepsilon - E(\mathbf{p})) \quad (84)$$

ハートリー・フォック近似によるエネルギー $E(\mathbf{p})$ を決める(83)の中にはグリーン関数 $\mathcal{G}(\mathbf{p}, i\varepsilon_n)$ が含まれ，そのグリーン関数を決める(82)には $E(\mathbf{p})$ が含まれている．したがって $E(\mathbf{p})$ を求めるためには(82)と(83)とを自己無撞着に解く必要がある．ただし得られるスペクトル関数はハートリー近似と同じく，デルタ関数となる．

## 7 ファインマン図形の方法

(80)をフーリエ展開せずにそのまま解くこともできる．その解は

$$\mathcal{G}(1, 1') = \mathcal{G}_0(1, 1') + \int d\bar{1}d\bar{2} \mathcal{G}_0(1, \bar{1}) \tilde{V}(\bar{1} - \bar{2}) \times [\mathcal{G}(\bar{2}, \bar{2}^+) \mathcal{G}(\bar{1}, 1') - \mathcal{G}(\bar{1}, \bar{2}^+) \mathcal{G}(\bar{2}, 1')] \quad (85)$$

与えられる<sup>19</sup>．ここで $\tilde{V}(\bar{1} - \bar{2}) = \delta(\tau_1 - \tau_2) V(\bar{\mathbf{r}}_1 - \bar{\mathbf{r}}_2)$ とした．これをファインマン図形を用いて表すと，図4の様になる．グリーン関数

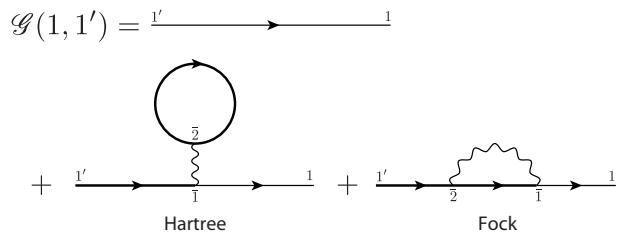


図4: ハートリー・フォック近似によるグリーン関数のファインマン図形

<sup>19</sup>これが(80)の解であることは，両辺に $\left( \frac{\partial}{\partial \tau_1} - \frac{\nabla_1^2}{2m} \right)$ をかけてみれば確かめられる．実際にこの微分を行うのではなく，

$$\left[ \frac{\partial}{\partial \tau_1} - \frac{\nabla_1^2}{2m} \right] \mathcal{G}_0(1, 1') = -\delta(1-1')$$

の関係をを用いる．

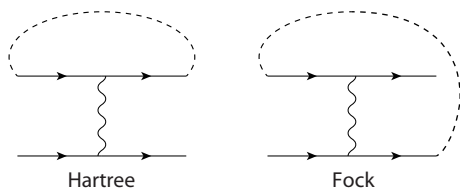


図 5: 元のハミルトニアンの外線を結べばグリーン関数の補正が得られる

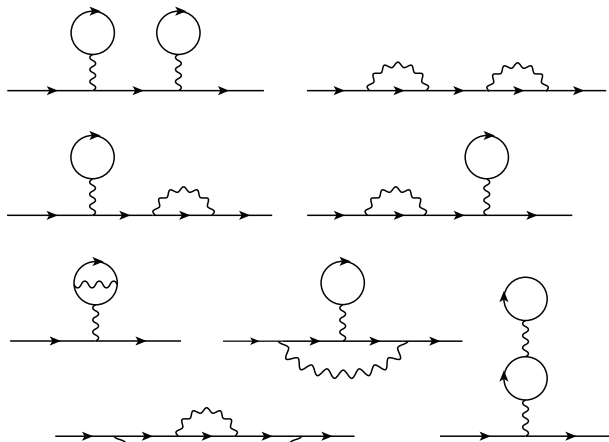


図 6: ハートリー・フォック近似による 2 次の図形

を表す線 ( $\mathcal{G}$  線) のうち,  $\mathcal{G}$  に対応する線は太線,  $\mathcal{G}_0$  は細線で表してある. この様にファインマン図形を用いて表すとハートリー項とフォック項の近似の構造が違うことが一目で明確にわかる.

前図の  $\mathcal{G}$  線を全て  $\mathcal{G}_0$  で置き換えたものは, グリーン関数を相互作用  $V$  で摂動展開した時の 1 次の補正に相当する. これは元のハミルトニアンの外線 2 本を結んだものとも考えることもできる (図 5). ここで外線とは,  $\mathcal{G}$  線のうち, 一端が他の図形につながり, 他端はつながっていない線を指す. これに対し, 内線は両端が他の図形につながっている  $\mathcal{G}$  線のことである.

では 2 次の補正はというと, 図 4 の  $\mathcal{G}$  線のどれか 1 本を 1 次のグリーン関数 (ハートリー項かフォック項) で置き換えれば良い. そうして得られた図形が図 6 である. これらの図形もやはり元のハミルトニアンの図形を 2 つ用意し, それらが “切り離

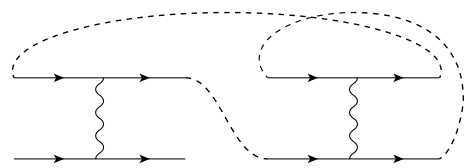


図 7: ハミルトニアン 2 つを切り離せない様に結べば 2 次の図形が得られる. この場合は図 6 左の上から 3 番目の図形になる.

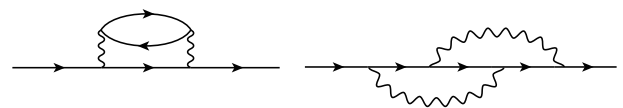


図 8: ハートリー・フォック近似に含まれない 2 次の図形

せない”様に外線を結んでいけば得られる (図 7).

そうした方法で図形を作っていけば, さらに図 6 に含まれない図 8 の図形も得られることに気付くであろう<sup>20</sup>. これらの図形はハートリー・フォック近似を超えたボルン近似により考慮することができる. この様にファインマン図形を援用すれば, 現在行っている近似の構造とその特徴が一目でわかるだけでなく, そこに含まれていない構造まで直感的につきとめることができるのである.

運動方程式から出発すれば常に正確な表式が得られる. しかし実際に高次項を考える際は, ファインマン図形で書き出したものを数式で表した方が容易である. 次に挙げるいくつかの規則さえ踏まえれば, ファインマン図形に対応する表式を得ることができる<sup>21</sup>.

実空間表示の場合

$m$  次の相互作用に対して:

1.  $m$  本の相互作用線 (波線) とそれらを粒

<sup>20</sup> 2 次の図形をただ思いっくま書き上げていくのでは, 数え落とす可能性がある. 図 7 で紹介した様に, ハミルトニアンを考えたい次数分用意し, 出ていく線と入ってくる線の可能な組み合わせを系統的に数え上げ, その後トポロジー的に同等な図形を重複しない様に削っていけば, 数え落とす心配はなく, より確実である.

<sup>21</sup> 実空間表示の 2. の規則に関して,  $i$  を始点,  $j$  を終点にとる流儀もある<sup>2)</sup> が, 定義が一貫していればどちらでも良い.

子線（方向を持った実線）でつなく、異なる図形をすべて描く。

2. 粒子線には  $\mathcal{G}_0(i, j)$  を対応させる。ここで  $i$  は粒子線の終点,  $j$  は始点にとる。
3.  $i$  と  $j$  を結ぶ相互作用線にはハミルトニアンで考えている摂動項  $V(i, j)$  を対応させる。
4. 粒子線と相互作用線の結節点（パーテックスともよぶ）全てにおける位置座標および虚時間について積分する：

$$\int dr_i \int_0^\beta d\tau_i \quad (86)$$

5. 全体の係数として

$$(-1)^{m+F} (2s+1)^F \quad (87)$$

をかける。ここで  $F$  は図形に含まれる（フェルミ粒子の）閉じたループの数であり,  $s$  はスピんで電子の場合  $s = 1/2$  である。

#### 運動量表示の場合

$m$  次の相互作用に対して：

1.  $m$  本の相互作用線（波線）とそれらを粒子線（方向を持った実線）でつなく、異なる図形をすべて描く。
2. 粒子線には  $\mathcal{G}_0(p_i, i\varepsilon_{n_i})$  を対応させる。このとき、各結節点では運動量と振動数を保存する様に内線の運動量と振動数を設定する。
3. 相互作用線には考えている摂動項の運動量表示  $V(p)$  を対応させる。
4. 全ての独立な運動量を積分し、松原振動数の和をとる：

$$\frac{1}{\beta^m} \sum_{n_i} \int dp_i \quad (88)$$

5. 全体の係数としてさらに

$$(-1)^{m+F} \frac{(2s+1)^F}{(2\pi)^{3m}} \quad (89)$$

をかける。

## 8 ボルン近似

ハートリー・フォック近似では、2粒子グリーン関数における粒子間の相互作用を無視した結果、ある運動量  $p$  についてはそのエネルギー  $E(p)$  が一意に定まった。しかもこのエネルギー固有値はそのまま保たれる。しかし現実の多粒子系では粒子間の相互作用により、運動量  $p$  の粒子の固有状態が乱される。これは粒子としての寿命が無限から有限になることを意味する。この様子を具体的に見るため、ここではボルン近似に基づいた計算を行う。

2粒子グリーン関数に対する近似の次の段階として、 $(1', 2')$  で付け加えた2粒子が時刻  $\tau_1''$  に位置  $r_1''$  と  $r_2''$  でお互い散乱を受け、その後  $(1, 2)$  に至る過程を考えてみる。これはファインマン図形で表せば図9のようになる。これら表式はそれぞれ

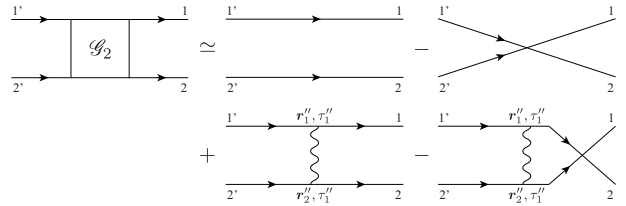


図9: ボルン近似に基づく2粒子グリーン関数

の実線にグリーン関数を割り振ることで次のようになる。

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_2(12, 1'2') &\simeq \mathcal{G}(1, 1')\mathcal{G}(2, 2') - \mathcal{G}(1, 2')\mathcal{G}(2, 1') \\ &- \int_0^\beta d\tau_1'' \int dr_1'' dr_2'' V(r_1'' - r_2'') \\ &\times [\mathcal{G}(1, 1'')\mathcal{G}(1'', 1')\mathcal{G}(2, 2'')\mathcal{G}(2'', 2') \\ &- \mathcal{G}(1, 2'')\mathcal{G}(2'', 2')\mathcal{G}(2, 1'')\mathcal{G}(1'', 1')]_{\tau_2''=\tau_1''} \quad (90) \end{aligned}$$

ここで1次項の全体に負号が付いているのは、ファインマン図形の規則に従って付け加えたものである。この過程は第1ボルン近似と呼ばれている。

2粒子グリーン関数に対する近似式が得られたので、あとはこれまでと同様に、運動方程式 (65) に代入してこれを解くだけである：

$$\left(\frac{\partial}{\partial \tau_1} - \frac{\nabla_1^2}{2m}\right) \mathcal{G}(1, 1') + \int_0^\beta d\tau_1'' \int d\mathbf{r}_1'' \Sigma(1, 1'') \mathcal{G}(1'', 1') = -\delta(1 - 1'). \quad (91)$$

ここで導入した  $\Sigma$  は自己エネルギーとよばれ、今の場合ハートリー・フォック近似によるものとボルン近似によるものに分けて考えることができる。

$$\begin{aligned} \Sigma(1, 1'') &= \Sigma_{\text{HF}}(1, 1'') + \Sigma_{\text{B}}(1, 1'') \quad (92) \\ \Sigma_{\text{HF}}(1, 1'') &= \delta(\tau_1 - \tau_1'') \\ &\times \left[ \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1'') \int d\mathbf{r}_2 V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \mathcal{G}(2, 2^+) \right. \\ &\quad \left. - V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1'') \mathcal{G}(1, 1''^+) \right] \quad (93) \\ \Sigma_{\text{B}}(1, 1'') &= - \int d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_2'' V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) V(\mathbf{r}_1'' - \mathbf{r}_2'') \\ &\times \left[ \mathcal{G}(1, 1'') \mathcal{G}(2, 2'') \mathcal{G}(2'', 2) \right. \\ &\quad \left. - \mathcal{G}(1, 2'') \mathcal{G}(2, 1'') \mathcal{G}(2'', 2) \right]_{\tau_2''=\tau_1''}^{\tau_2=\tau_1} \quad (94) \end{aligned}$$

## 8.1 複雑なフーリエ展開

第1ボルン近似に基づく運動方程式が得られたので、並進不変性がある場合を考え、フーリエ展開を行う。

フーリエ展開と一言でいっても、多変数が絡むフーリエ展開であり、ここまでくると計算は少々厄介である。(66) をフーリエ展開する際は因子  $e^{-i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1')}$  を両辺にかけるという手順をとった。簡単なフーリエ展開の場合、この手順を取ればただちにフーリエ展開が実行できるので便利である。しかし多変数のフーリエ展開の場合、この因子として何をかけるべきかをすぐに見い出すのは難しい。そこでここでは、多少計算量が増えるが、着実にフーリエ展開できる別の方法(ここでは“代入法”とよんでおく)を紹介する。

(91) 左辺第二項のフーリエ展開を考える。簡単のため、まず運動量空間に着目する。ここで現れる  $\Sigma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1')$  のフーリエ展開は

$$\Sigma(\mathbf{r}) = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \Sigma(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \quad (95)$$

である ( $\mathcal{G}$  についても同様) ので、これを (91) に代入する：

$$\begin{aligned} &\int d\mathbf{r}_1'' \Sigma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1'') \mathcal{G}(\mathbf{r}_1'', \mathbf{r}_1') \\ &= \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{r}_1''}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1'')} e^{i\mathbf{p}'\cdot(\mathbf{r}_1'' - \mathbf{r}_1')} \\ &\times \Sigma(\mathbf{p}) \mathcal{G}(\mathbf{p}') \quad (96) \end{aligned}$$

ここで  $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1''$  と  $\mathbf{r}_1'' - \mathbf{r}_1'$  に対する波数を  $\mathbf{p}$  と  $\mathbf{p}'$  のように独立にとっておく必要があることに注意すること。 $\mathbf{r}_1''$  に対する積分を実行すると、 $(2\pi)^3 \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p})$  が現れる (\*14 の式参照)。さらに  $\mathbf{p}'$  についての積分を行えば、このデルタ関数のため結局  $\mathbf{p} = \mathbf{p}'$  となり、

$$\int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1')} \Sigma(\mathbf{p}) \mathcal{G}(\mathbf{p}) \quad (97)$$

となる。 $\int d\mathbf{p} (2\pi)^{-3} e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1')}$  の部分は (91) の両辺に共通である。時間についてのフーリエ展開も同様にして<sup>22</sup>、運動方程式は

$$\left(i\varepsilon_n - \frac{p^2}{2m} - \Sigma(\mathbf{p}, i\varepsilon_n)\right) \mathcal{G}(\mathbf{p}, i\varepsilon_n) = 1 \quad (98)$$

となる。このように、(95) に相当するフーリエ展開の公式を代入し、積分を次々に実行しさえすれば目的のフーリエ展開の式に確実にたどり着くことができる。ただし最終的にどの形に持っていくのか(今の場合  $\int d\mathbf{p} e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1')}$  の因子を残した形)を見据えて、積分する変数を取り違えないよう注意が必要である。

代入法のさらに複雑な適用例として、 $\Sigma_{\text{B}}$  のフーリエ展開を行う。まず (94) の右辺第1項(の空間

<sup>22</sup>虚時間については

$$\int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} = \beta \delta_{\omega_n}$$

の関係が成り立つことを示すことができる(例えば AGD (14.5) 式など) ここで  $\omega_n$  は、 $\varepsilon_n - \varepsilon'_n$  といった振動数の組み合わせで、必ず(偶数)  $\times \pi T$  である。



依存性) を取り上げる .

$$\begin{aligned} \Sigma_{\text{B}}^{\text{1st}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) &= - \int d\mathbf{r}_2 \mathbf{r}'_2 \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{q}'}{(2\pi)^3} V(\mathbf{q})V(\mathbf{q}') \\ &\times e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)} e^{i\mathbf{q}'\cdot(\mathbf{r}'_1-\mathbf{r}'_2)} \\ &\times \int \frac{d\mathbf{p}_1}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{p}_2}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} \mathcal{G}(\mathbf{p}_1)\mathcal{G}(\mathbf{p}_2)\mathcal{G}(\mathbf{p}') \\ &\times e^{i\mathbf{p}_1\cdot(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}'_1)} e^{i\mathbf{p}_2\cdot(\mathbf{r}_2-\mathbf{r}'_2)} e^{i\mathbf{p}'\cdot(\mathbf{r}'_2-\mathbf{r}_2)} \end{aligned} \quad (99)$$

$\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2$  についての積分を実行すれば, それぞれ  $(2\pi)^3\delta(-\mathbf{q}+\mathbf{p}_2-\mathbf{p}')$ ,  $(2\pi)^3\delta(-\mathbf{q}'-\mathbf{p}_2+\mathbf{p}')$  が現れるので, 続いて  $\mathbf{q}, \mathbf{q}'$  についての積分も行うと

$$\begin{aligned} \Sigma_{\text{B}}^{\text{1st}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) &= - \int \frac{d\mathbf{p}_1}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{p}_2}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} e^{i(\mathbf{p}_1+\mathbf{p}_2-\mathbf{p}')\cdot(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}'_1)} \\ &\times V(\mathbf{p}_2-\mathbf{p}')V(\mathbf{p}'-\mathbf{p}_2)\mathcal{G}(\mathbf{p}_1)\mathcal{G}(\mathbf{p}_2)\mathcal{G}(\mathbf{p}') \end{aligned} \quad (100)$$

となる . ここで

$$\Sigma_{\text{B}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}'_1)} \Sigma_{\text{B}}(\mathbf{p}) \quad (101)$$

であるので, この形にあわせるためには

$$\begin{aligned} \Sigma_{\text{B}}^{\text{1st}}(\mathbf{p}) &= - \int \frac{d\mathbf{p}_1}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{p}_2}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} \\ &\times \{V(\mathbf{p}-\mathbf{p}_1)\}^2 \mathcal{G}(\mathbf{p}_1)\mathcal{G}(\mathbf{p}_2)\mathcal{G}(\mathbf{p}') \\ &\times (2\pi)^3\delta(\mathbf{p}+\mathbf{p}'-\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_2) \end{aligned} \quad (102)$$

とすれば良い . 上式で  $\mathbf{p}_1$  と  $\mathbf{p}_2$  は対称な形に入っているので,  $\{V(\mathbf{p}-\mathbf{p}_1)\}^2 \rightarrow [\{V(\mathbf{p}-\mathbf{p}_1)\}^2 + \{V(\mathbf{p}-\mathbf{p}_2)\}^2]/2$  とすることができる . 全く同様に計算すれば, 第二項は

$$\begin{aligned} \Sigma_{\text{B}}^{\text{2nd}}(\mathbf{p}) &= \int \frac{d\mathbf{p}_1}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{p}_2}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} \\ &\times V(\mathbf{p}-\mathbf{p}_1)V(\mathbf{p}-\mathbf{p}_2)\mathcal{G}(\mathbf{p}_1)\mathcal{G}(\mathbf{p}_2)\mathcal{G}(\mathbf{p}') \\ &\times (2\pi)^3\delta(\mathbf{p}+\mathbf{p}'-\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_2) \end{aligned} \quad (103)$$

となる . 以上をまとめて,

$$\begin{aligned} \Sigma_{\text{B}}(\mathbf{p}) &= - \int \frac{d\mathbf{p}_1}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{p}_2}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} \\ &\times \frac{1}{2} \{V(\mathbf{p}-\mathbf{p}_1) - V(\mathbf{p}-\mathbf{p}_2)\}^2 \mathcal{G}(\mathbf{p}_1)\mathcal{G}(\mathbf{p}_2)\mathcal{G}(\mathbf{p}') \\ &\times (2\pi)^3\delta(\mathbf{p}+\mathbf{p}'-\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_2) \end{aligned} \quad (104)$$

が得られる . ここで現れたデルタ関数は運動量保存則を表しており, 対称化された相互作用

$\{V(\mathbf{p}-\mathbf{p}_1) - V(\mathbf{p}-\mathbf{p}_2)\}^2/2$  は第 1 ボルン近似の衝突断面積に比例している . このようにフーリエ展開を正しく行えば, 自動的に運動量保存則が満たされる形が得られる .

## 8.2 相互作用による減衰

ボルン近似によるグリーン関数を (98) のように求めることができた . 2 粒子グリーン関数に対する近似の詳細によらず, 一般的なグリーン関数も同じ形で表せる :

$$\mathcal{G}(\mathbf{p}, i\varepsilon_n) = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}} - \Sigma(\mathbf{p}, i\varepsilon_n)}. \quad (105)$$

遅延グリーン関数を得たときと同様に, 遅延自己エネルギーを  $i\varepsilon_n \rightarrow \varepsilon + i\delta$  の手続きによって定義する :

$$\Sigma(\mathbf{p}, i\varepsilon_n) \Rightarrow \Sigma^{\text{R}}(\mathbf{p}, \varepsilon) \quad (106)$$

このとき遅延グリーン関数は

$$G^{\text{R}}(\mathbf{p}, \varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - \xi_{\mathbf{p}} - \Sigma^{\text{R}}(\mathbf{p}, \varepsilon) + i\delta} \quad (107)$$

となるので, スペクトル関数の定義 (41) より,

$$A(\mathbf{p}, \varepsilon) = \frac{\Gamma(\mathbf{p}, \varepsilon)}{[\varepsilon - \xi_{\mathbf{p}} - \text{Re}\Sigma^{\text{R}}(\mathbf{p}, \varepsilon)]^2 + [\Gamma(\mathbf{p}, \varepsilon)/2]^2} \quad (108)$$

が得られる . ここで遅延自己エネルギーの虚部を  $\Gamma(\mathbf{p}, \varepsilon) = -2\text{Im}\Sigma^{\text{R}}(\mathbf{p}, \varepsilon)$  とした .

このように粒子間の相互作用があれば, スペクトル関数はローレンツ型共鳴曲線となる (図 3) . 遅延自己エネルギーの虚部  $\Gamma$  がゼロに近づけば自由粒子 (あるいはハートリー・フォック近似) の場合と同じデルタ関数に近づく . スペクトル関数の  $\varepsilon$  依存性を逆フーリエ展開すれば

$$A(\mathbf{p}, t-t') = \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} A(\mathbf{p}, \varepsilon) e^{-i\varepsilon(t-t')} \quad (109)$$

であり, これは運動量  $\mathbf{p}$  を持つ粒子を時刻  $t'$  に付け加え,  $t$  に取り除いた時に元の状態に戻る遷移確率に対応している . この積分は  $\Gamma$  の  $\varepsilon$  依存性を無視すれば  $e^{-\Gamma(\mathbf{p})(t-t')}$  の形を持つことから,  $\Gamma$  が 1 粒

励起状態の減衰（あるいはその寿命  $\tau = 1/2\Gamma$ ）を決めていることがわかる。

もう少し別の見方もできる。デルタ関数のフーリエ展開は一定値であるということを思い出し、欲しい。スペクトル関数のエネルギーの依存性がデルタ関数ということは、時間に対しては一定であるということ。つまり、1粒子励起状態が時間に依存せず、恒久的に続くことを意味している。スペクトル関数がデルタ関数から少し鈍れば、その分時間依存性が生じ、これが1粒子励起状態を減衰させる。この様に（エネルギー  $\leftrightarrow$  時間）あるいは（波数空間  $\leftrightarrow$  実空間）の対応を意識しておく、直感的に理解しやすい。

## （その1）のまとめ

**温度グリーン関数** グリーン関数およびファインマン図形の方法は「虚時間  $\tau$ 」を導入することで有限温度でも用いることができる。温度グリーン関数は消滅演算子と生成演算子の積の期待値として定義される。フーリエ展開すればグリーン関数は非常に簡単な形—ただの分数—で与えられる。たとえばエネルギー  $\xi_p$  をもつ自由粒子系の温度グリーン関数は

$$\mathcal{G}_0(\mathbf{p}, i\varepsilon_n) = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p} \quad (110)$$

となる。 $i\varepsilon_n$  は虚時間  $\tau$  に対する松原振動数である。より一般に考えているハミルトニアンを  $\hat{\mathcal{H}}$  とすれば、

$$\mathcal{G}(1, 1') = \left\langle 1 \left| \frac{1}{i\varepsilon_n - \hat{\mathcal{H}}} \right| 1' \right\rangle \quad (111)$$

とも表せる。

**遅延・先進グリーン関数** 具体的な物理量の計算を行うには、温度グリーン関数を解析接続することによって遅延あるいは先進グリーン関数  $G^R$ ,  $G^A$  に変換しておく必要がある。解析接続は単に  $i\varepsilon_n \rightarrow \varepsilon \pm i\delta$  の操作を行えば良い。遅延グリーン関数は

$$A(\mathbf{p}, \varepsilon) = -2\text{Im}G^R(\mathbf{p}, \varepsilon) \quad (112)$$

によってスペクトル関数と結びついている。スペクトル関数は準粒子の電子状態を直接反映し、角度分解光電子分光などで測定される物理量である。自由粒子系でスペクトル関数は  $A_0(\mathbf{p}, \varepsilon) = 2\pi\delta(\varepsilon - \xi_p)$  のようにデルタ関数となる。

**運動方程式** ハイゼンベルグの運動方程式を生成・消滅演算子に適用することで、グリーン関数の運動方程式を得る。1粒子グリーン関数の運動方程式は2粒子グリーン関数によって与えられる。一般に、粒子間に相互作用がある場合は2粒子グリーン関数を厳密に求めることができない。そこで2粒子グリーン関数に対して何らかの近似を施すことによって1粒子グリーン関数の近似的表式を得る。その近似の例としてハートリー・フォック近似とボルン近似を取り上げた。

**ハートリー・フォック近似** 2粒子グリーン関数を近似的に求めるにあたって、最も簡単なのは、2粒子グリーン関数を相互作用しない二つの1粒子グリーン関数で近似することである。これはいわゆるハートリー・フォック近似に相当する。ハートリー・フォック近似による補正を加えた準粒子のエネルギーを  $E(\mathbf{p})$  とすれば、1粒子グリーン関数は

$$\mathcal{G}(\mathbf{p}, i\varepsilon_n) = \frac{1}{i\varepsilon_n - E(\mathbf{p})} \quad (113)$$

と、やはり“ただの分数”で表せる。ただし  $E(\mathbf{p})$  の中に  $\mathcal{G}$  を含んでいるので、これは自己無撞着に決める必要がある。この時のスペクトル関数もデルタ関数になる： $A(\mathbf{p}, \varepsilon) = 2\pi\delta(\varepsilon - E(\mathbf{p}))$ 。

**ボルン近似** 2粒子グリーン関数に対する次の近似として、粒子間相互作用による散乱を1次だけ考える。これは第1ボルン近似と呼ばれる。フーリエ展開すれば簡単に表せて

$$\mathcal{G}(\mathbf{p}, i\varepsilon_n) = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p - \Sigma(\mathbf{p}, i\varepsilon_n)} \quad (114)$$

となる。ここで現れた  $\Sigma(\mathbf{p}, i\varepsilon_n)$  は自己エネルギーとよばれ、解析接続した遅延自己エネルギーの虚部を準粒子の寿命と考えることができる。またこの虚部によりスペクトル関数はデルタ関数からローレンツ型共鳴曲線のように一定の幅を持つようになる。

以上でグリーン関数とファインマン図形の方法を一通り見たこととなる。ここで学んだ知識をもとにあとはひたすら具体的な物理量を計算していけば良い。その手始めとして次回は久保公式に基づいて電気伝導度を計算する具体的方法を紹介する。

## 参考文献

- [1] R. Kubo: J. Phys. Soc. Jpn. **12** (1957) 570.
- [2] A. Abrikosov, L. Gorkov, and I. Dzyaloshinskii: *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics* (Dover Books on Physics Series. Dover Publications, 1975), Dover Books on Physics Series.
- [3] A. Fetter and J. Walecka: *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (Dover Books on Physics. Dover Publications, 2012), Dover Books on Physics.
- [4] G. Mahan: *Many-Particle Physics* (Physics of Solids and Liquids. Springer, 2000), Physics of Solids and Liquids.
- [5] カダノフ・ベイム: 量子統計力学 (丸善プラネット, 2011).
- [6] 阿部龍蔵: 統計力学 (東京大学出版会, 1992).
- [7] 高田康民: 多体問題 (朝倉書店, 1999).
- [8] T. Matsubara: Prog. Theor. Phys. **14** (1955) 351.
- [9] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, and I. E. Dzyaloshinskii: Sov. Phys. JETP **9** (1959) 636.
- [10] E. S. Fradkin: Sov. Phys. JETP **9** (1959) 912.
- [11] H. Ezawa, Y. Tomozawa, and H. Umezawa: Nuovo Cim. **5** (1957) 810.